

ОТЗЫВ

об автореферате диссертации **Мазуренко Владимира Владимировича** «Влияние гибридизации атомных состояний, электронных корреляций и спин-орбитальной связи на магнитные свойства соединений переходных металлов», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа посвящена решению ряда методических и практических задач, связанных с учетом спин-орбитальной связи, гибридизации атомных состояний и динамических электронных корреляций при моделировании магнитных свойств современных материалов на основе переходных металлов. В качестве объектов исследования выбраны материалы, демонстрирующие необычные виды магнитных возбуждений, имеющие перспективы практического применения и активно исследуемые как теоретически, так и экспериментально. В связи с вышеизложенным, актуальность диссертационной работы Мазуренко В.В., выполненной в рамках направления «реалистичного моделирования», не вызывает сомнения.

В диссертации получен ряд новых научных результатов, например, предложен оригинальный первопринципный метод описания анизотропных магнитных взаимодействий Дзялошинского-Мории для слабого ферромагнетизма в антиферромагнетиках; разработан новый микроскопический подход для расчета изотропных обменных взаимодействий в случае сильного перекрытия орбиталей Ванье, описывающих материалы со значительной гибридизацией между состояниями атома металла и ближайшими лигандами; построена и решена многочастичная модель поверхностной наносистемы Co/Pt.

Полученные в диссертации данные о параметрах магнитных взаимодействий в системах Fe_2O_3 и La_2CuO_4 , $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ представляют большой интерес, как для экспериментаторов, так и теоретиков, занимающихся исследованием этих перспективных материалов. Данные о магнитных свойствах наносистемы Co/Pt открывают потенциальную возможность контроля над отдельными $3d$ -состояниями атомов переходных металлов в рамках экспериментов по сканирующей туннельной микроскопии.

Следует отметить замечание по автореферату:

Вызывают сомнения, приведенные в таблице 1 значения, вычисленных методами LMTO-LSDA и LMTO-LDA+U, констант обменных взаимодействий, приведенные с точностью до тысячных мэВ, хотя известно,

что даже более точные методы не позволяют получать значения энергии с точностью более чем одна десятая мэВ.

Указанное замечание не имеет принципиального значения и никоим образом не умаляет научную и практическую ценность полученных результатов.

Диссертационная работа Мазуренко В.В. является законченным квалификационным научным исследованием, содержащим решение актуальной научной и практической задачи по учету влияния спин-орбитальной связи и гибридизации на магнитные свойства материалов с сильными электронными корреляциями. Работа выполнена на высоком научном уровне, автором получена новая научная и практически значимая информация по магнитным характеристикам и свойствам перспективных оксидных и силицидных систем. Полученные при выполнении диссертационной работы результаты по новизне, достоверности, научной и практической значимости удовлетворяют требованиям ВАК предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор, Мазуренко Владимира Владимировича, безусловно, заслуживает присуждения ему искомой ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Гельчинский Борис Рафаилович

Доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией порошковых, композиционных и наноматериалов, Федеральное государственное учреждение науки Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук.

620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101.

Тел./факс: 343 267 8914.

e-mail: brg47@list.ru

<http://www.imet-uran.ru>

22.09.2011

Подпись зав. лабораторией, д.ф.-м.н. Гельчинского Б.Р. заверяю.

Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН, к.х.н.

Пономарев В.И.

